УДК 519.21

О ПРИМЕНЕНИИ ВЕЙВЛЕТНО-МУЛЬТИФРАКТАЛЬНОГО АНАЛИЗА В ЗАДАЧЕ ОЦЕНКИ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛА

ВОЛЧУК В. Н., *д. т. н., доц.*
Кафедра материаловедения и обработки материалов, Государственное высшее учебное заведение «Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры», ул. Чернышевского, 24а, 49600, Днепропетровск, Украина, тел. +38 (0562) 47-39-56, e-mail: volchuky@yandex.ua, ORCID ID: 0000-0001-8717-6786

Аннотация. ***Постановка проблемы***. С целью получения приемлемых результатов оценки структуры металла разрабатываемая методика должна включать в себя использование как классических, так и современных методов ее оценки и свойств производимого изделия. Так, для установления взаимосвязи между механическими свойствами и элементами структуры металла планируется использование теории мультифракталов. Предлагаемая методика является наиболее приемлемой для количественной оценки большинства реальных структур, аппроксимация которых целочисленными фигурами Евклида вносит определенную погрешность, и поэтому не всегда приемлема в практических задачах современного материаловедения. Согласно предлагаемой методике, каждый неоднородный объект, которым являются структуры большинства металлов, может характеризоваться спектром статистических размерностей Реньи. Спектр размерностей мультифракталов интерпретируется как некоторые физические закономерности, которые обладают отдельными статистическими свойствами, делающими возможным их материальное представление. Применение статистических размерностей элементов структуры для оценки качественных характеристик металла способствует их формализации как функции фрактальной размерности. В свою очередь, это делает возможным определение и прогнозирование физико-механических свойств металла, не производя специальных механических испытаний. ***Цель статьи*** J получить информацию о возможности применения методов вейвлетно-мультифрактального анализа для оценки микроструктуры металла. ***Вывод.*** С помощью методов вейвлетно-мультифрактального анализа проведена статистическая оценка элементов структуры стали Ст3пс. Анализ характеристик однородности, упорядоченности и регулярности элементов структуры показал, что наибольшее их изменение наблюдается у образцов, подвергнутых ускоренному охлаждению в воде в интервале температур промежуточного (бейнитного) превращения 550 – 450 ^{0}С, меньшее – у образцов, охлажденных в интервале температур перлитного превращения 650 – 600 ^{0}С, и наименьшее – у образца в состоянии заводской поставки. Эти результаты подтверждают их чувствительность к структурным превращениям, а, соответственно, и к механическим свойствам.

Ключевые слова: *микроструктура, мультифрактал, статистические характеристики, вейвлетный анализ, металл*

ПРО ЗАСТОСУВАННЯ ВЕЙВЛЕТНО-МУЛЬТИФРАКТАЛЬНОГО АНАЛІЗУ В ЗАДАЧІ ОЦІНЮВАННЯ СТРУКТУРИ МЕТАЛУ

ВОЛЧУК В. М., *д. т. н., доц.*
Кафедра матеріалознавства та обробки матеріалів, Державний вищий навчальний заклад «Придніпровська державна академія будівництва та архітектури», вул. Чернишевського, 24а, 49600, Дніпропетровськ, Україна, тел. +38 (0562) 47-39-56, e-mail: volchuky@yandex.ua, ORCID ID: 0000-0001-8717-6786

Анотація. ***Постановка проблеми.*** З метою отримання прийнятних результатів оцінювання структури металу розроблювана методика повинна містити в собі використання як класичних, так і сучасних методів її оцінювання та властивостей виробу. Так, для встановлення взаємозв'язку між механічними властивостями і елементами структури металу планується використання теорії мультифракталів. Запропонована методика найбільш прийнятна для кількісного оцінювання більшості реальних структур, апроксимація яких цілочисловими фігурами Евкліда вносить певну похибку і тому не завжди прийнятна для практичних завдань сучасного матеріалознавства. Відповідно до запропонованої методики, кожен неоднорідний об'єкт, яким є структури більшості металів, може характеризуватися спектром статистичних розмірностей Реньї. Спектр розмірностей мультифракталів інтерпретується як деякі фізичні закономірності, що мають окремі статистичні властивості і роблять можливим їх матеріальне подання. Застосування статистичних розмірностей елементів структури для оцінювання якісних характеристик металу сприяє їх формалізації як функції фрактальної розмірності. У свою чергу це робить можливим визначення й прогнозування фізико-механічних властивостей металу без проведення спеціальних механічних випробувань. ***Мета статті*** J одержати інформацію про можливості застосування методів вейвлетно-мультифрактального аналізу для оцінювання мікроструктури металу. ***Висновок.*** За допомогою методів вейвлетно-мультифрактального аналізу проведено статистичну оцінку елементів структури сталі Ст3пс. Аналіз характеристик однорідності, упорядкованості та регулярності елементів структури показав, що найбільша їх зміна спостерігається у зразків, що піддаються прискореному охолодженню у воді в інтервалі температур проміжного (бейнітного) перетворення 550 – 450^{0}С, менше – у зразків, охолоджених в інтервалі температур перлітного перетворення 650 − 600 ^{0}С, і найменше − у зразка в стані заводської поставки. Ці результати підтверджують їх чутливість до структурних перетворень, а, відповідно, і до механічних властивостей.

Ключові слова: *мікроструктура, мультифрактал, статистичні характеристики, вейвлетний аналіз, металл*

THE APPLICATION OF WAVELET-MULTIFRACTAL ANALYSIS IN PROBLEMS OF METAL STRUCTURE

VOLCHUK V. N., *Dr. Sc. (Tech.)*.
Department of Materials Science, State Higher Education Establishment «Pridneprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture», 24-a, Chernishevskogo str., Dnipropetrovsk 49600, Ukraine, tel. +38 (0562) 47-39-56, e-mail: volchuky@yandex.ua, ORCID ID: 0000-0001-8717-6786

Summary. ***Raising of problem.*** In order to obtain acceptable results of the evaluation of the metal structure developed methodology should include the use of both classical and modern methods of its evaluation and the properties of the produced goods. Thus, to establish the relationship between mechanical properties and structural elements of metall to use multifractal theory. The proposed method is the most appropriate to quantify the majority of real structures, which are integral approximation figures Euclid introduces some uncertainty, and therefore not always acceptable in practical problems of modern materials science. According to the proposed method, each of heterogeneous objects, which are the structures most metals can be characterized by variety of statistical Renyi dimensions. The range of dimensions multifractals interpreted as some of the physical laws, which have a separate statistical properties that make it possible to their financial performance. Application of statistical dimensions of the structural elements for the assessment of qualitative characteristics of metal contributes to their formalization as a function of the fractal dimension. This in turn makes it possible to identify and anticipate the physical and mechanical properties of the metal without producing special mechanical tests. ***Purpose*** – obtain information about the possible application of wavelet-multifractal analysis to assess the microstructure of the metal. ***Conclusion.*** Using the methods of wavelet multifractal analysis, a statistical evaluation of the structural elements of steel St3ps. An analysis of the characteristics of uniformity, consistency and regularity of the structural elements has shown that most of the change observed in the samples subjected to accelerated cooling water in the temperature range of the intermediate (bainitic) conversion 550 – 450^{0}C, less - in samples cooled in the temperature range 650 pearlite transformation – 600^{0}C and the smallest in the sample in a state factory supplied. These results confirm their sensitivity to structural transformations, and, respectively, and mechanical properties.

Keywords: *microstructure, multifractal, statistical characteristics, wavelet analysis, metal*

Введение. С целью получения приемлемых результатов оценки структуры металла разрабатываемая методика должна включать в себя использование как классических, так и современных методов ее оценки и свойств производимого изделия. Так, для установления взаимосвязи между механическими свойствами и элементами структуры металла планируется использование теории мультифракталов [1-3]. Предлагаемая методика является наиболее приемлемой для количественной оценки большинства реальных структур, аппроксимация которых целочисленными фигурами Евклида вносит определенную погрешность, и поэтому не всегда приемлема в практических задачах современного материаловедения. Согласно предлагаемой методике, каждый неоднородный объект, которым являются структуры большинства металлов, может характеризоваться спектром статистических размерностей Реньи. Спектр размерностей мультифракталов интерпретируется как некоторые физические закономерности, которые обладают отдельными статистическими свойствами, делающими возможным их материальное представление.

Применение статистических размерностей элементов структуры для оценки качественных характеристик металла способствует их формализации как функции фрактальной размерности. В свою очередь, это делает возможным определение и прогнозирование физико-механических свойств металла, не производя специальных механических испытаний. ***Цель работы*** J получить информацию о возможности применения методов вейвлетно-мультифрактального анализа для оценки микроструктуры металла.

Материал и методики исследований. Объектом исследований являлась микроструктура стали Ст3пс (0,14 % С) и связь ее статистических характеристик с механическими свойствами. Выбор данной марки стали обусловлен тем, что в ее структуре интегрируются те основные составляющие (фазы), которые встречаются в близких по химическому составу малоуглеродистых низколегированных сталях, широко используемых в строительстве и других отраслях народного хозяйства.

Из круга сечением ∅ 24 мм были подготовлены комплекты стандартных образцов. С целью изменения структуры и механических свойств образцы подвергались термической обработке: нагреву до 930 ^{0}С при выдержке 12 мин с ускоренным охлаждением в воде до указанных в таблице температур и дальнейшим охлаждением на воздухе. Скорость охлаждения образцов в воде (~25 ^{0}С) до указанных температур определялась с помощью термопары и была равна 40 ^{0}С/сек. Согласно ГОСТ 9454 для механических испытаний изготовлено по три образца на ударную вязкость и три на растяжение для каждого режима термообработки и изготовлены шлифы для микроисследований.

Таблица

Данные по термической обработке и механическим испытаниям Ст3пс

№ образца	Режим термообработки	Механические свойства					
		HRB	$±_B$, *МПа*	$±_T$, *МПа*	¢, %	·, %	KCU^{+20}, *Дж/см*^{2}
1	В состоянии поставки	66	450	285	34	73	22
2	Вода: 930-650 ^{0}С	77	457	302	28	71	19
3	Вода: 930-600 ^{0}С	84	485	320	26	71	17
4	Вода: 930-550 ^{0}С	85	500	328	26	67	16
5	Вода: 930-500 ^{0}С	88	540	400	21	66	16
6	Вода: 930-450 ^{0}С	93	645	472	21	66	16
7	Вода: 930-400 ^{0}С	96	698	530	18	65	15

После шлифования и полирования проводили травление шлифов в 4 % растворе азотной кислоты в этиловом спирте. Изучение структуры осуществлялось с помощью оптического микроскопа “Неофот 2” при ×500. В результате микроисследований установлено, что структура образца 1 (рис. 1 *а*) и образца 2 (рис. 1 *б*) по сечению одинаковая и состоит из феррита (83 %) и перлита (17 %). Балл зерна феррита оценивался № 7, 8 по ГОСТ 5639. Микроструктура остальных образцов смешанная, состоит из продуктов промежуточного превращения и не подлежит строгой количественной оценке с помощью классических методов металлографии [4]. Она состоит из верхнего и нижнего бейнита, феррита, представленного в виде ориентированных видманштеттовых пластин (рис. 1 *в, г, е*); бейнита, троостита и ферритной сетки (рис. 1 *д*); верхнего и нижнего бейнита и тонкой ферритной сетки (рис. 1 *ж*). Подобные структуры характеризуются сложной конфигурацией элементов и неоднородным распределением их по объему, что влияет на механические свойства.

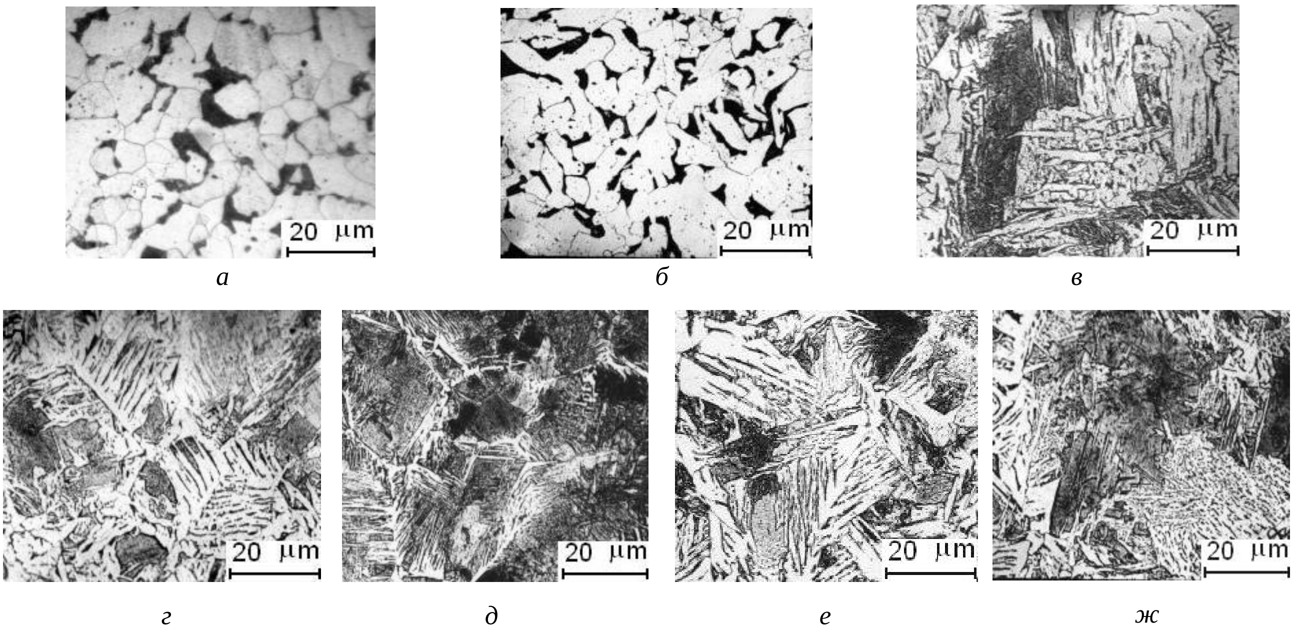


Рис. 1. Структура стали Ст3пс: а J *центр образца 1; б* J *центр образца 2; в* J *середина образца 3; г* J *центр образца 4; д* J *край образца 5; е* J *край образца 6; ж*J *центр образца 7*

Результаты и их обсуждение. Микроструктуры были сфотографированы, переведены в электронный вид цифровой камерой «Olympus C-50» и представлены в 256-цветном формате BMP с оттенками серого цвета. Для улучшения воспроизводимости результатов с каждого из семи шлифов получено девять фотоснимков: по три на расстоянии *0, 6* и *12 мм* от центра. В ходе анализа цифровых фотоснимков микроструктуры были выявлены такие фрагменты, которые имели дефекты полировки в виде “мусора” (пятен и царапин), размытые и неконтрастные границы между светлыми и темными участками элементов структуры.

С целью повышения качества фотоснимков микроструктуры их обработку проводили на основе вейвлет-анализа [5]. Алгоритмы вейвлет-обработки изображения опираются на относительно жёсткие критерии – ограниченный набор уровней разложения, ограниченный набор оптимальных вейвлет-базисов и т. д. Это позволило формализовать процедуру вейвлет-обработки и свести до минимума ошибку, возникающую вследствие некорректно заданных параметров обработки.

Обработку проводили локально с помощью дискретного вейвлета Хаара второго порядка с гладкостью функции 5 [6], что позволило при анализе границ цвета элементов структуры выявить контрастные границы между ними и устранить дефекты полировки. На рисунке 2 приведен пример фрагмента структуры стали Ст3пс до вейвлет-обработки с частично размытыми границами между элементами структуры и после обработки с контрастными границами.

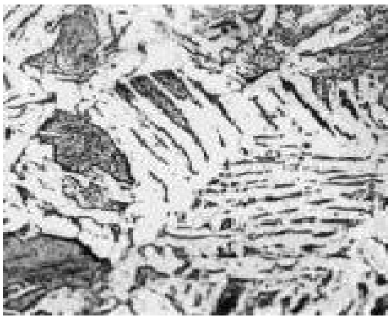
Оценку статистических характеристик структурных составляющих (фаз) стали Ст3пс проводили с применением теории мультифракталов [7]. В ее основе лежит генерация меры, которая заключается в разбиении пространства, охватывающего изучаемый объект (носитель меры), на квадраты, кубики или окружности размером £. Для этого был создан программный продукт, алгоритм которого основан на описанных ниже закономерностях (1)-(3) и состоял из следующих этапов:

1-й этап. Генерация меры проводилась по светлым и темным участкам структуры при 100 % площади покрытия изображения квадратными ячейками 35×35 пикселей, что при ×500 соответствует 24,7×24,7 мкм.

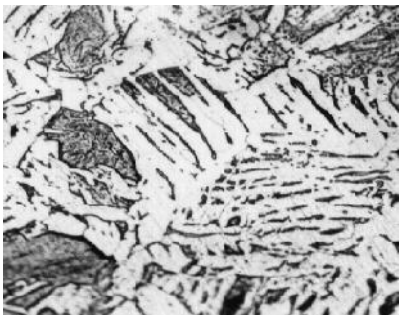
2-й этап. Рассчитана обобщенная статистическая сумма $Z(q,£)$ распределения вероятностей по всем точкам исследуемого объекта (структуры), для которой справедливо соотношение вида:

$$Z(q,£) = \sum_{i=1}^{N} p_i^q \propto £^{-²(q)}, \qquad (1)$$

где p_i - вероятность попадания точки, находящейся на исследуемом объекте, в *i*-ю ячейку квадратной сетки размером £, а показатель степени *q* может принимать любые значения в диапазоне от $-\infty$ до $+\infty$. В данном случае он изменялся в интервале от $q_{\min} = -100$ до $q_{\max} = 100$.



а



б

Рис. 2. Увеличенный фрагмент структуры, приведенной на рис. 1 г, до (а) и после вейвлет-обработки (б)

3-й этап. Массовый показатель $²(q)$ определяли с использованием линейной аппроксимации $\log Z(q,£) - \log £$, физический смысл которой заключается в плотности заселенности светлыми / темными точками (пикселями) занимаемой площади:

$$²(q) = \lim_{£ \to 0} \frac{\ln Z(q,£)}{\ln £}. \qquad (2)$$

4-й этап. Для оценки статистических характеристик элементов структуры применяли канонический спектр сингулярностей $f(\sim)$ [5], представляющих собой набор хаусдорфовых размерностей однородных подмножеств (элементов структуры) исходного множества (структуры), которые дают наибольший вклад в статистическую сумму (1) при заданных *q*. Он характеризуется одинаковыми вероятностями заполнения ячеек $p_i(£) \approx £^{\sim}$ с показателем степени α. Спектр $f(\sim)$ получали путем преобразований Лежандра функции $²(q)$ для каждой структурной составляющей (фазы) каждого отдельного взятого фотоснимка:

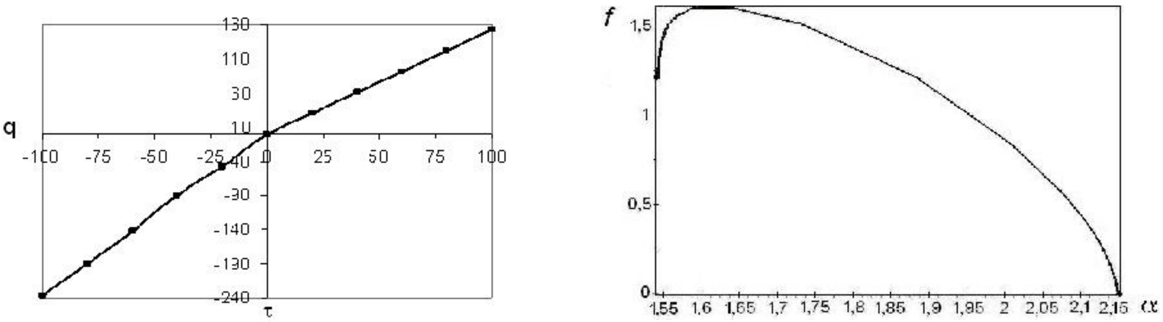
$$\begin{cases} \sim = \dfrac{d²(q)}{dq}, \\ f(\sim) = q\sim - ²(q) \end{cases}. \qquad (3)$$

5-й этап. По результатам анализа канонического спектра $f(\sim)$, рассчитаны:

– *однородность*, которая описывает локальную дефектность структуры, пористость или шероховатость ее отдельных элементов. В нашем случае ей соответствует величина $f(\sim)$ (при $q = 100$), возрастание которой свидетельствует о возрастании однородности структуры. Если структура полностью однородна, то спектр $f(\sim)$ вырождается в точку. Неоднородность здесь означает неравномерное распределение точек по областям, на которые разбивается структура, то есть ее геометрически одинаковые элементы заполнены точками с различной вероятностью;

– *упорядоченность* (скрытая периодичность) $\Delta = f(\sim)_{q=1} - f(\sim)_{q=100}$ и *регулярность* $K = f(\sim)_{q=-100} - f(\sim)_{q=100}$ характеризуют меру нарушения симметрии конфигурации структуры или степень неравновесности системы. Чем больше значение показателей a_{1-100} и *K*, тем выше содержание в структуре периодических составляющих (повторяющихся структурных элементов одной фазы) и тем более она упорядочена.

На рисунке 3 приведены примеры функций ²(q) и $f(\sim)$. Статистические характеристики перлита рассчитаны на основе анализа спектра $f(\sim)$ (рис. 3 *б*): однородность $f_{перлита} = 1{,}21$, упорядоченность $\Delta_{перлита} = 1{,}59 - 1{,}545 = 0{,}045$ и регулярность $K_{перлита} = 2{,}15 - 1{,}545 = 0{,}605$.



а *б*

Рис. 3. Массовый показатель (а) и спектр сингулярностей (б), вычисленные для темных участков структуры (перлита), которая приведена на рис. 1 б

Выводы. С помощью методов вейвлет-но-мультифрактального анализа проведена статистическая оценка элементов структуры стали Ст3пс.

Анализ характеристик однородности, упорядоченности и регулярности элементов структуры показал, что наибольшее их изменение наблюдается у образцов, подвергнутых ускоренному охлаждению в воде в интервале температур промежуточного (бейнитного) превращения 550 – 450 ^{0}С, меньшее – у образцов, охлажденных в интервале температур перлитного превращения 650 – 600 ^{0}С, и наименьшее – у образца в состоянии заводской поставки. Эти результаты подтверждают их чувствительность к структурным превращениям, а, соответственно, и к механическим свойствам [7].

ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Большаков В. И. Фракталы в материаловедении / В. И. Большаков, В. Н. Волчук, Ю. И. Дубров. – Днепропетровск : ПГАСА, 2005. – 253 с. – Режим доступа: http://anvsu.org.ua/index.files/Biographies/Bolchakov.htm.
2. Hentschel H. G. The infinite number of generalized dimensions of fractals and strange attractors / H. G. Hentschel, I. E. Procaccia // Physica D: Nonlinear Phenomena. – 1983. – Vol. 8, iss. 3. – P. 435-444. – Режим доступа: https://www.google.com.ua/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=1&cad=rja&uact=8&ved=0CBwQFjAAahUKEwji_8CSz5DHAhXE6xQKHZ57DRo&url=http%3A%2F%2Fgji.oxfordjournals.org%2Fcontent%2F107%2F1%2F155.full.pdf&ei=sk_BVeLeCcTXU573tdAB&usg=AFQjCNEO34XxRMy-1_rJsxq5cp2r-tyxuQ&bvm=bv.99261572,d.bGQ.
3. Большаков В. И. Особенности применения мультифрактального формализма в материаловедении / В. И. Большаков, В. Н. Волчук, Ю. И. Дубров // Доповіді Національної академії наук України. – 2008. – № 11. – С. 99-107. – Режим доступа: http://www.dopovidi.nas.gov.ua/2008-11/.
4. Салтыков С. А. Стереометрическая металлография (стереология металлических материалов) / С. А. Салтыков. – Москва : Металлургия, 1976. – 270 с. – Режим доступа: http://library.kpi.ua:8991/F?func=find-b&request=000253361&find_code=SYS.

5. Смоленцев Н. К. Введение в теорию вейвлетов / Н. К. Смоленцев. – Москва ; Ижевск : Регулярная и хаотическая динамика, 2010. – 292 с. – Режим доступа: https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%92%D0%B5%D0%B9%D0%B2%D0%BB%D0%B5%D1%82.
6. Daubechies I. Ten lectures on wavelets / I. Daubechies. – Philadelphia : Society for Industrial and Applied Mathematics Philadelphia, 1992. – 357 p. – Режим доступа: http://dl.acm.org/citation.cfm?id=130655.
7. Большаков В. И. Материаловедческие аспекты применения вейвлетно-мультифрактального подхода для оценки структуры и свойств малоуглеродистой низколегированной стали / В. И. Большаков, В. Н. Волчук // Металлофизика. и новейшие технологии. – Киев, 2011. – Т. 33, № 3. – С. 347-360. – Режим доступа: http://mfint.imp.kiev.ua/ru/toc/v33/i03.html.

REFERENCES

1. Bol'shakov V.I., Volchuk V.N. and Dubrov Yu.I. *Fraktaly v materialovedenii* [Fractals in materials]. Dnepropetrovsk: PGASA, 2005, 253 p. Available at: http://anvsu.org.ua/index.files/Biographies/Bolchakov.htm (in Russian).
2. Hentschel H.G. and Procaccia I.E. *The infinite number of generalized dimensions of fractals and strange attractors. Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1983, vol. 8, iss. 3, pp. 435-444. Available at: https://www.google.com.ua/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=1&cad=rja&uact=8&ved=0CBwQFjAAahUKEwji_8CSz5DHAhXE6xQKHZ57DRo&url=http%3A%2F%2Fgji.oxfordjournals.org%2Fcontent%2F107%2F1%2F155.full.pdf&ei=sk_BVeLeCcTXU573tdAB&usg=AFQjCNEO34XxRMy-1_rJsxq5cp2r-tyxuQ&bvm=bv.99261572,d.bGQ
3. Bolshakov V.I., Volchuk V.N. and Dubrov Yu.I. *Osobennosti primeneniya mul'tifraktal'nogo formalizma v materialovedenii* [Features of the multifractal formalism in materials]. *Dopovidi Natsionalnoi akademii nauk Ukrainy* [Reports of the National Academy of Sciences of Ukraine]. 2008, no. 11, pp. 99-107. Available at: http://www.dopovidi.nas.gov.ua/2008-11/ (in Rissian).
4. Saltykov S.A. *Stereometricheskaya metallografiya (stereologiya metallicheskikh materialov)* [Stereometric metallography]. Moscow: Metallurgy, 1976, 270 p. Available at: http://library.kpi.ua:8991/F?func=find-b&request=000253361&find_code=SYS (in Russian).
5. Smolentsev N.K. *Vvedeniye v teoriyu veyvletov* [Introduction to the theory of wavelets]. Moscow, Izhevsk: Regulyarnaya i khaoticheskaya dinamika, 2010, 292 p. Available at: https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%92%D0%B5%D0%B9%D0%B2%D0%BB%D0%B5%D1%82 (in Russian).
6. Daubechies I. *Ten lectures on wavelets*. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics Philadelphia, 1992, 357 p. Available at: http://dl.acm.org/citation.cfm?id=130655
7. Bolshakov V.I. and Volchuk V.N. *Materialovedcheskiye aspekty primeneniya veyvletno-mul'tifraktal'nogo podkhoda dlya otsenki struktury i svoystv malouglerodistoy stali* [Materialovedchesky aspects of wavelet-multifractal approach for assessing the structure and properties of low-carbon steel]. *Metallofizika. i noveyshie tekhnologii* [Metal Physics and Advanced Technologies]. Kiev, 2011, vol. 33, no. 3, pp. 347-360. Available at: http://mfint.imp.kiev.ua/ru/toc/v33/i03.html (in Russian).

Стаття рекомендована до друку 09.08.2015 р. Рецензент: д-р ф.-м. н., проф. Башев В.Ф.

Надійшла до редколегії: 31.07.2015 р. Прийнята до друку: 9.08.2015 р.